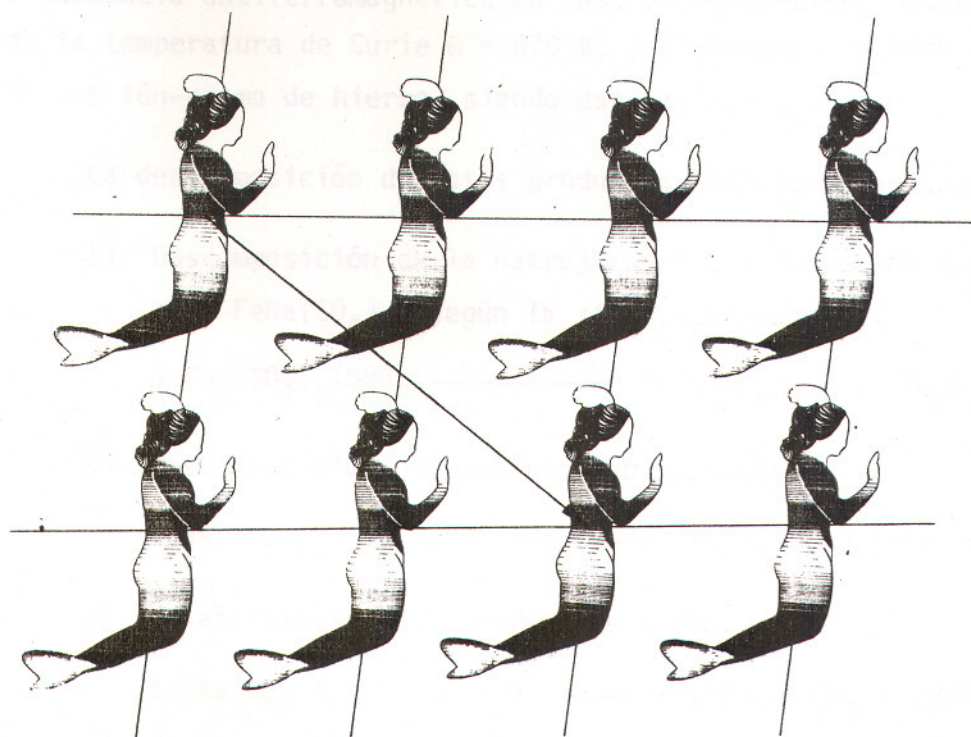


**IXa. Reunión Científica
del Grupo Español de Cristalografía
Pura y Aplicada**

**LIBRO DE RESÚMENES DE CONFERENCIAS
Y COMUNICACIONES**



Sitges, 3-6 octubre 1983

DETERMINACION DEL PORCENTAJE DE SUSTITUCION ISOMORFICA EN HIDROXICLORUROS DE METALES BIVALENTES POR DIFFRACCION DE RAYOS-X: CALCULO DE FACTORES DE ESTRUCTURA.

P2

S. López Andrés, A. Ruiz-Amil, O. García Martínez.

Instituto de Química Inorgánica "Elhuyar", C.S.I.C., Madrid.

Partiendo de los parámetros de la celdilla unidad, que nos proporcionan los trabajos de Wolff (1)(2), Nowacki (3) y Brasseur (4) se han calculado los factores de estructura teóricos de hidroxiclорuros de metales bivalentes, así como la de sus mezclas con distintas sustituciones isomórficas.

Teniendo en cuenta que las hidroxisales tienen estructura laminar similar a la de los silicatos, se han calculado las curvas de factores de estructura mediante una serie de Fourier unidimensional a lo largo del eje --C (5), según la expresión:

$$F_z = \sum_s N_s f_s(r^*) \exp(2\pi i r_z r^*) = \sum_s N_s f_s(r^*) (\cos 2\pi r_z r^* + i \sin 2\pi r_z r^*)$$

donde F_z es el factor de estructura de la capa, siendo N_s la proporción de átomos de cada clase de elementos contenidos en la celdilla.

Las curvas obtenidas a partir de estos cálculos nos sirven para identificar la cantidad de catión sustituido isomórficamente si se comparan con las curvas calculadas con los datos experimentales que nos proporcionan los difractogramas. De esta comparación se puede deducir la fórmula empírica de las hidroxisales en estudio, sin necesidad de recurrir a métodos químicos - analíticos, que en este tipo de compuestos microcristalinos conllevan serias dificultades, debido a los problemas de adsorción que estas sustancias presentan.

1. P.M. Wolff. Acta Cryst., 6, 359, (1953).
2. P.M. Wolff et L. Walter Lévy. Acta Cryst., 6, 40, (1953).
3. W. Nowacki and J.N. Silverman., Z. Krist., 115, 21, (1961).
4. H. Brasseur et J. Toussaint. Bull. Soc. Roy. Sci. Liege, 11, 555, (1942).
5. A. Ruiz Amil, A. Ramírez García y D.M.C. MacEwan. Anal. Edaf. XXVII, 7-8, 493, (1968).